

Lepkość wewnętrzna zawiesin cząstek o dowolnym kształcie

Bogdan Cichocki

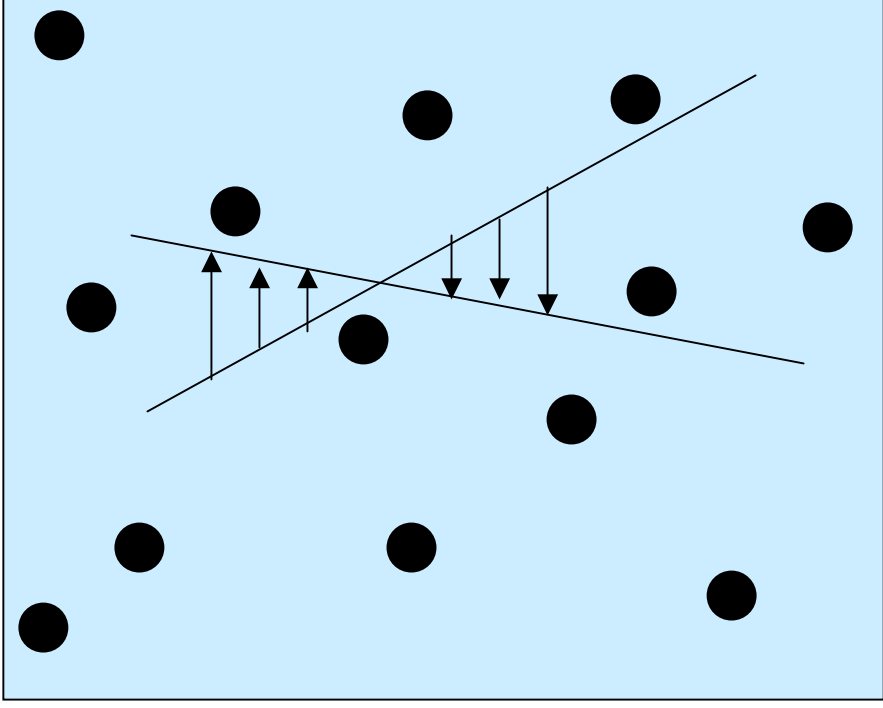
IFT UW

Maria L. Ekiel-Jeżewska i Eligiusz Wajnryb

IPPT PAN

IPPT, 23-11-2011

Zawieszina w przepływie ścinającym



$$v_o(\mathbf{r}) = \mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{r}$$

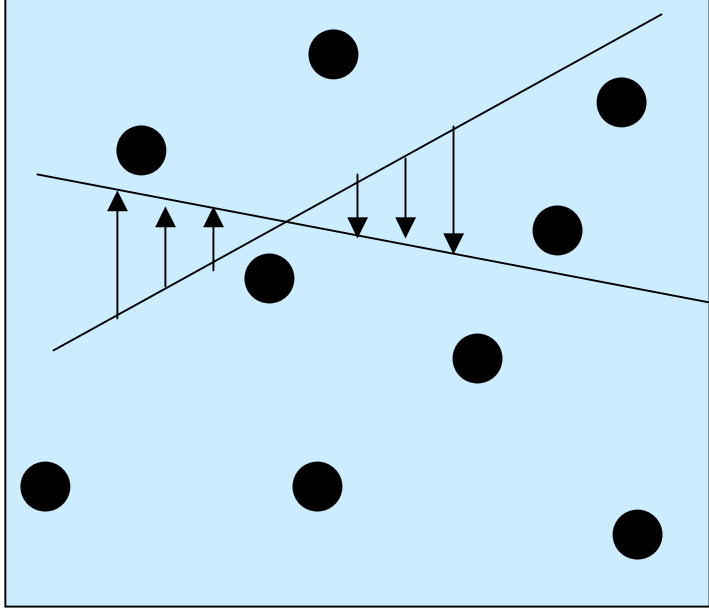
przepływ zewnętrzny tensor szybkości
ściania

$$\sigma_{eff}^v = 2\eta_{eff} \mathbf{g}_{eff}$$

efektywny tensor napięć (część lepkościowa)
efektywny tensor szybkości ścinania

lepkość efektywna

Zawiesina w przepływie ścinającym cd.



$$\dots \eta_{eff} \rightarrow \langle \dots \rangle$$

średnia po rozkładzie „mezostanów” cząstek

lepkość wewnętrzna koncentracja cząstek

$$\eta_{eff} = \eta_0 (1 + [\eta] \frac{N}{V} + \dots)$$

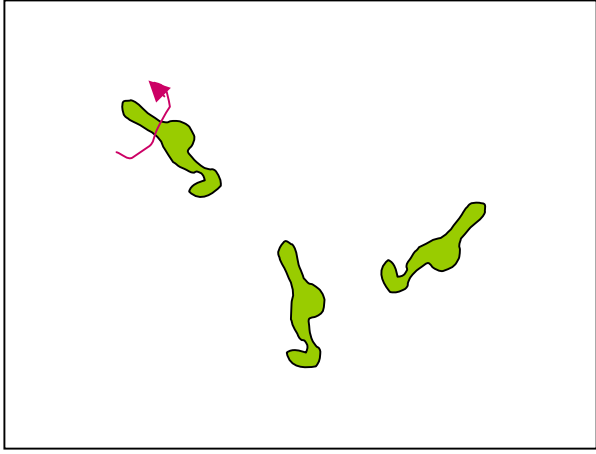
$$[\eta] = \frac{5}{2} V_{sphere}$$

sztywne kule
„stick b.c.”

A. Einstein, 1905 „1” !!

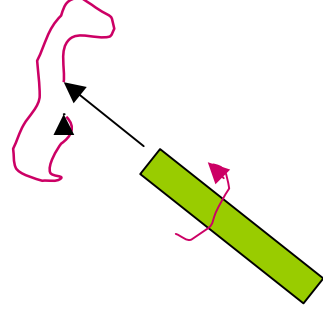
corrected 1911 (Hopf)

Zawieszina w oscylującym przepływie ścinającym



$$\langle \sigma \rangle_{\omega}^v = 2\eta_{\text{eff}}(\omega) \langle \mathbf{g} \rangle_{\omega} \sim \exp(-i\omega t)$$

$$\eta_{\text{eff}}(\omega) = \eta_0 \left(1 + [\eta]_{\omega}^N \frac{N}{V} + \dots \right) \\ = [\eta]_{\infty} + [\eta]_{\omega}^B$$

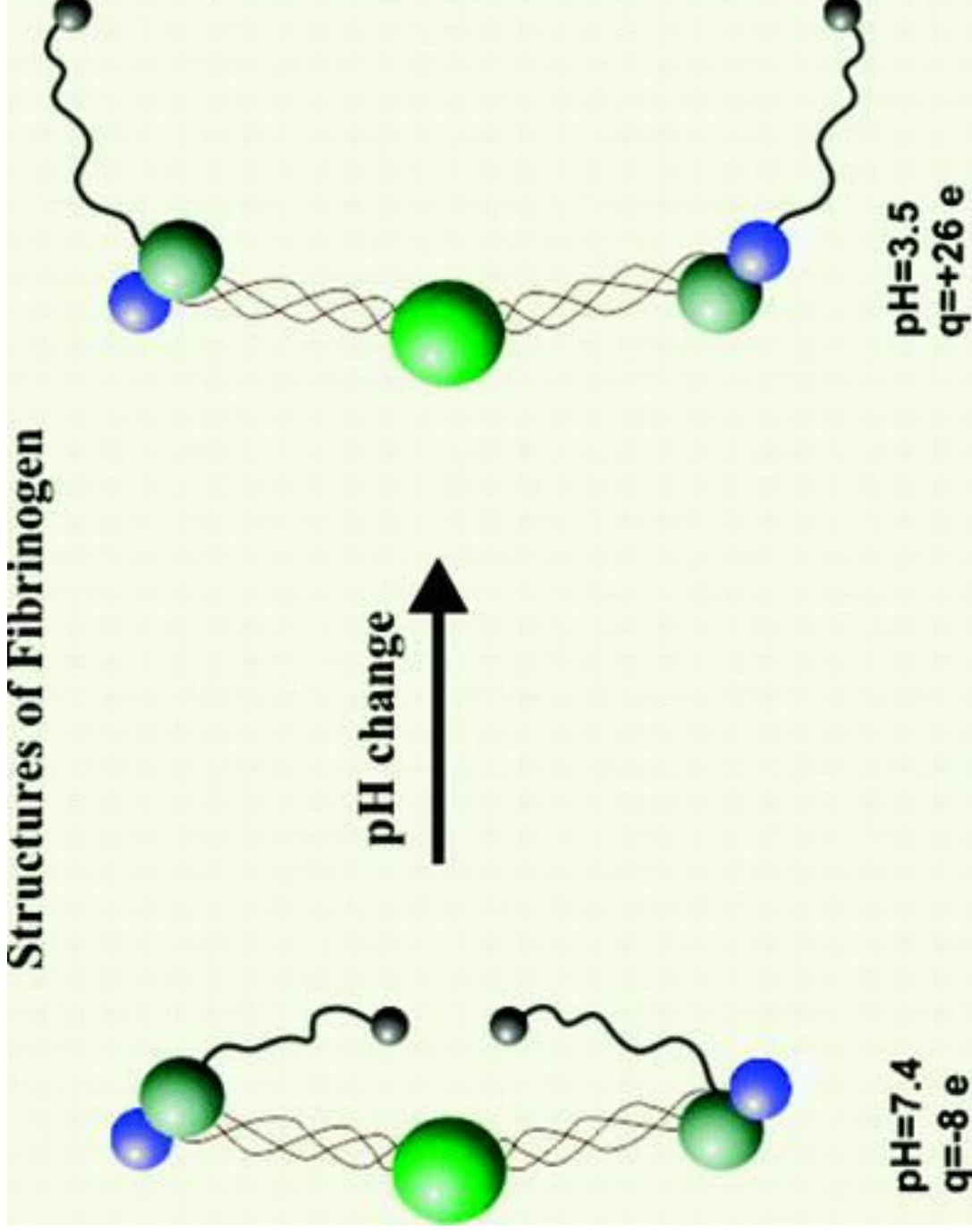


cząstki o symetrii osiowej

wkład od rotacyjnych
ruchów Browna

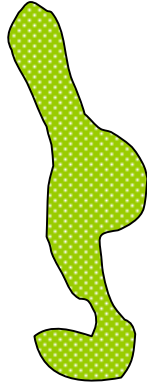
H. Brenner, 1972
S. Kim and S.J. Karilla, 1991

Structures of Fibrinogen



M. Wasilewska, Z. Adamczyk i B. Jachimska, Langmuir (2009)

- Lepkość wewnętrzna zawiera informację o kształcie i rozmiarach cząstek.
- Pomiar lepkości wewnętrznej jest w miarę prosty.
- Pomiar ten przeprowadzany jest w makroskopowej skali czasu (\sim s) dużo większej od mezoskopowej ($\sim\mu$ s) skali charakteryzującej rotacyjne ruchy Browna.
- Mierzona jest zatem lepkość wewnętrzna dla $\omega=0$.
- Wkłady Brownowskie muszą być uwzględnione!



$f(\mathbf{r})$ – gęstość sił jakimi cząstka
działa na płyn

$$\int_{V_c} d\mathbf{r} \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \mathbf{F} \quad - \quad \text{całkowita siła}$$

$$\int_{V_c} d\mathbf{r} \mathbf{r} \times \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \mathbf{T} \quad - \quad \text{całkowity moment siły}$$

$$\int_{V_c} d\mathbf{r} [\mathbf{r} \mathbf{f}(\mathbf{r})] = \mathbf{S} \quad - \quad \text{„stresslet”}$$

część symetryczna bezśladowa

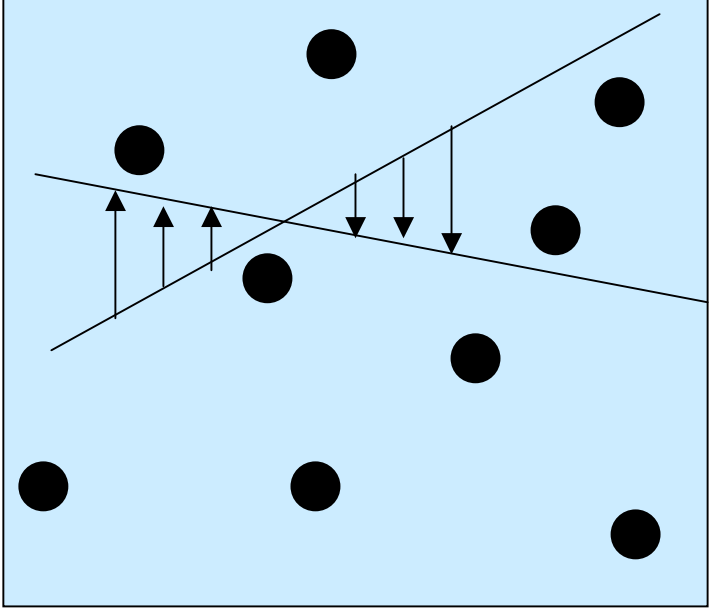
Uogólniona macierz ruchliwości dla pojedynczej cząstki

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c} \text{prędkość} \\ \text{translacyjna} \end{array} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{\Omega} \\ -\mathbf{S} \end{bmatrix} \\
 \begin{array}{c} \text{prędkość} \\ \text{obrotowa} \end{array} \rightarrow \\
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{c} \mu^{tt} \quad \mu^{tr} \quad \mu^{td} \\ \mu^{rt} \quad \mu^{rr} \quad \mu^{rd} \\ \mu^{dt} \quad \mu^{dr} \quad \mu^{dd} \end{array} \\
 \begin{array}{c} \text{sila} \\ \text{moment} \\ \text{sily} \end{array} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{T} \\ \mathbf{g}_0 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

tensor
szybkości ścinania



obliczenia numeryczne
np. HYDROMULTIPOLE



$$\langle \sigma \rangle_{\omega}^{\nu} = 2\eta_0 \langle \mathbf{g} \rangle_{\omega} - \langle \mathbf{S} \rangle_{\omega} \frac{N}{V}$$

Stany rotacyjne cząstki

$$\hat{\Omega} = (\alpha, \beta, \gamma)$$

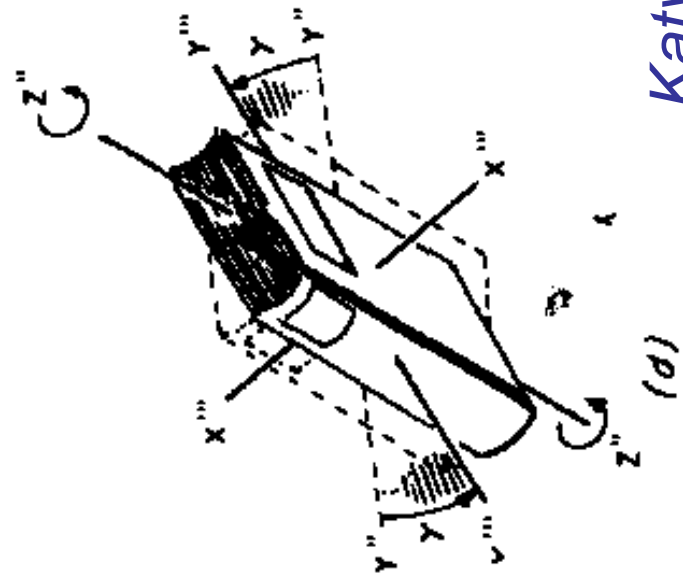
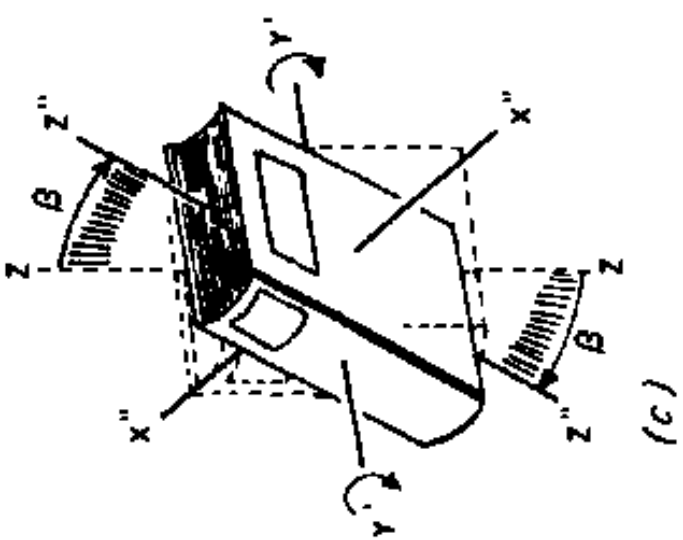
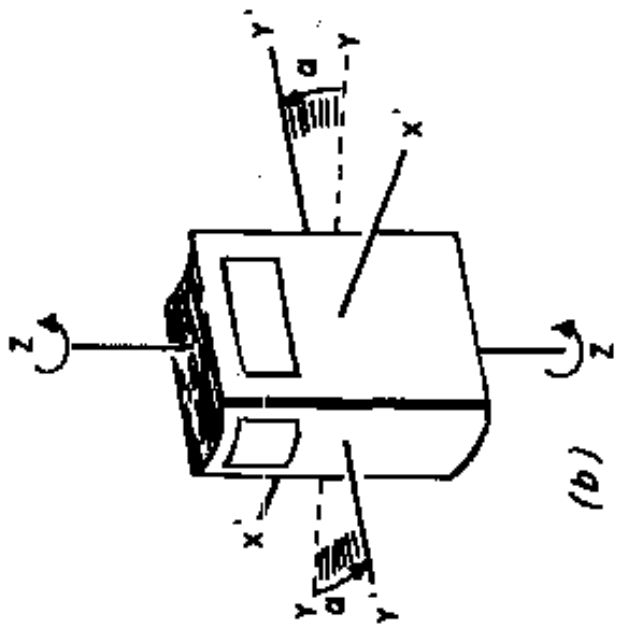
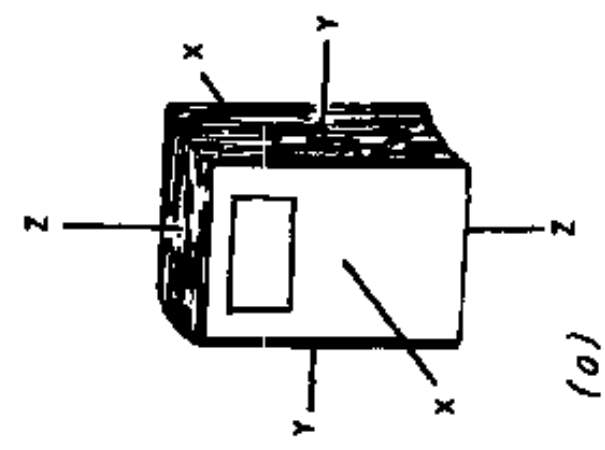
kąty Eulera

$$P(\hat{\Omega}, t)$$

rozkład prawdopodobieństwa w chwili t

$$\int d\hat{\Omega} P(\hat{\Omega}, t) = 1$$

$$\int d\hat{\Omega} = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^{\pi} d\beta \sin \beta$$



Kąty Eulera

Równanie Smoluchowskiego dla rotacyjnych ruchów Browna

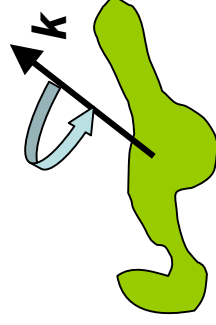
$$\frac{\partial}{\partial t} P(\hat{\Omega}, t) = -L \cdot D^{rr} \cdot LP(\hat{\Omega}, t)$$

$$D^{rr} = k_B T \boldsymbol{\mu}^{rr}$$

$$L = (L_x, L_y, L_z)$$

$$L_k = -i \frac{\partial}{\partial \varphi_k}$$

operator momentu pędu



Favro, 1960

Rotacyjne ruchy Browna w przepływie ścinającym

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\hat{\Omega}, t) = -L \cdot D^{rr} \cdot LP(\hat{\Omega}, t) - iL \cdot \boldsymbol{\mu}^{rd} : \mathbf{g}_0 P(\hat{\Omega}, t)$$

Rozwiązanie omawianego problemu - teoria liniowej odpowiedzi

$$\mathbf{T}_{Br} = -ik_B T L \ln P(\hat{\Omega}, t) \quad \text{„Brownowski” moment siły}$$

$$-\langle \mathbf{S} \rangle_t = \left\langle \boldsymbol{\mu}^{dr} \cdot \mathbf{T}_{Br} \right\rangle_t \quad \text{wkład do efektywnego tensora napięć}$$

Wkład Brownowski do lepkości wewnętrznej

$$[\eta]_{\omega}^B = \frac{k_B T}{80\pi^2} \int d\hat{\Omega} H_{ij}(\hat{\Omega}) \frac{1}{i\omega + \mathbf{L} \cdot \mathbf{D}^{rr} \cdot \mathbf{L}} H_{ij}(\hat{\Omega})$$

$$H_{ij} = iL_k \mu_{kij}^{rd}$$

Funkcje Wignera – zupełny, ortogonalny układ dla $f(\hat{\Omega})$

$$D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega}), \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad m, k = -j, -j+1, \dots, j$$

$$L^2 D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega}) = j(j+1) D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega})$$

$$L_z D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega}) = m D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega})$$

space-fixed z' axis

$$L_z D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega}) = -k D_{m,k}^{(j)}(\hat{\Omega})$$

body-fixed z axis

Wybieramy układ związany z cząstką, w którym \mathbf{D}^{rr} jest diagonalne

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{D}^{rr} \cdot \mathbf{L} = D_x^r L_x^2 + D_y^r L_y^2 + D_z^r L_z^2$$

Zagadnienie własne:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{D}^{rr} \cdot \mathbf{L} \psi_{M,K}^{(j)}(\hat{\Omega}) = f_K^{(j)} \psi_{M,K}^{(j)}(\hat{\Omega})$$



liniowa kombinacja funkcji $D_{m,K}^{(j)}(\hat{\Omega})$

Korzystamy z rozwiązania tylko dla $j=2$ - B.J. Berne and R.Pecora, 1976
L.D. Favro, 1960

tensor symetryczny bezśladowy

$j=2$

$$H_{ij} = iL_k \mu_{kij}^{rd} = b(\varepsilon_{ilm} \mu_{lmj}^{rd} + \varepsilon_{jlm} \mu_{lmj}^{rd}),$$

$$D^{(1)} \times D^{(2)} = D^{(1)} + D^{(2)} + D^{(3)}$$

czynnik $b=1$ → Rallison (1978)

$$H_{xx} = 2(\mu_{zyx}^{rd} - \mu_{yzx}^{rd})$$

$$H_{yz} = \mu_{xzz}^{rd} - \mu_{zxx}^{rd} + \mu_{yyx}^{rd} - \mu_{xyy}^{rd}$$

+ permutacje (x,y,z)

Formalizm macierzy obrotu, Rallison (1978)

$$r_i = R_{ij} r_j \quad i, j = x, y, z$$

elementy macierzy obrotu

$$\frac{\partial}{\partial \varphi_k} = iL_k = \varepsilon_{kij} R_{ip} \frac{\partial}{\partial R_{jp}}$$

tutaj elementy macierzy obrotu można traktować jako niezależne

$$\mu_{kij}^{rd} = R_{kl} R_{ps} R_{mn} \mu_{lsn}^{rd(0)}$$

Końcowy wynik:

$$[\eta]_{\omega}^B = \frac{k_B T}{10} \sum_{i=1}^5 \frac{A_i}{i\omega + f_i}$$

$$f_1 = 6D + 2\Delta,$$

$$A_1 + A_2 = H_{xx}^2 + H_{yy}^2 + H_{zz}^2$$

$$f_2 = 6D - 2\Delta,$$

$$A_1 - A_2 = \frac{c_x D_x + c_y D_y + c_z D_z}{\Delta}$$

$$f_3 = 3(D_x + D),$$

$$A_3 = 2H_{yz}^2$$

$$f_4 = 3(D_y + D),$$

$$A_4 = 2H_{zx}^2$$

$$f_5 = 3(D_z + D),$$

$$A_5 = 2H_{xy}^2$$

$$D = (D_x + D_y + D_z) / 3$$

$$\Delta = (D_x^2 + D_y^2 + D_z^2 - D_x D_y - D_x D_z - D_y D_z)^{1/2}$$

$$c_x = -2H_{xx}^2 + H_{yy}^2 + H_{zz}^2, \quad c_y, c_z \rightarrow \text{perm}(x, y, z)$$

Ciąg dalszy nastąpi:

Wykorzystanie wyprowadzonych wzorów dla białek

- obliczenia numeryczne
- porównanie z wynikami eksperymentalnymi